

Un algorithme de point fixe pour calculer des barycentres robustes entre mesures

Eloi TANGUY, Julie DELON, Nathaël GOZLAN

Université Paris Cité,
CNRS, MAP5, F-75006 Paris, France
eloi.tanguy@u-paris.fr, julie.delon@u-paris.fr
nathael.gozlan@u-paris.fr

Résumé – Les barycentres de Wasserstein représentent des distributions moyennes entre plusieurs mesures de probabilité pour la distance de Wasserstein. Le calcul numérique de ces barycentres est notoirement difficile. Une approche courante consiste à utiliser des méthodes de point fixe, similaires à celles employées pour le calcul des moyennes de Fréchet sur les variétés. La convergence de telles méthodes pour les barycentres W_2 et des mesures absolument continues a été étudiée par Alvarez-Esteban et al. dans [3]. Dans cet article, nous examinons comment cette méthode peut être généralisée pour des coûts de transport variés, en particulier robustes aux outliers, et des mesures de probabilité génériques. Nous établissons des résultats de convergence pour cette approche et illustrons son comportement numérique sur plusieurs problèmes.

Abstract – Wasserstein barycentres represent average distributions between multiple probability measures for the Wasserstein distance. The numerical computation of Wasserstein barycentres is notoriously challenging. A common approach involves using fixed-point methods, akin to those employed for computing Fréchet means on manifolds. The convergence of such methods for W_2 barycentres and absolutely continuous measures was studied by Alvarez-Esteban et al. in [3]. In this paper, we explore how this method can be generalized to account for varying transportation costs, particularly those robust to outliers, and to generic probability measures. We show convergence results for this approach and illustrate its numerical behaviour on several applications.

1 Introduction

Les barycentres de Wasserstein constituent un outil fondamental en théorie du transport optimal. Ils permettent de calculer une moyenne entre plusieurs mesures de probabilité tout en préservant leur structure géométrique. Cette propriété les rend particulièrement adaptés aux applications en apprentissage automatique, notamment en traitement d’images [14], modélisation générative [11], adaptation de domaine [13], clustering [10, 12], ou encore en sélection de modèles bayésiens [4].

Le coût de transport optimal entre deux mesures de probabilité μ et ν sur des espaces métriques $(\mathcal{X}, d_{\mathcal{X}})$ et $(\mathcal{Y}, d_{\mathcal{Y}})$ est défini par

$$\mathcal{T}_c(\mu, \nu) = \inf_{\pi \in \Pi(\mu, \nu)} \int_{\mathcal{X} \times \mathcal{Y}} c d\pi,$$

où $\Pi(\mu, \nu)$ est l’ensemble des mesures sur $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ ayant μ et ν comme marginales. Le problème du barycentre pour K mesures ν_k et des fonctions de coût c_k est alors formulé comme :

$$\bar{\mu} \in \operatorname{argmin}_{\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})} \sum_{k=1}^K \mathcal{T}_{c_k}(\mu, \nu_k) =: V(\mu). \quad (1)$$

Lorsque l’espace sous-jacent est un espace polonais $(\mathcal{X}, d_{\mathcal{X}}) = (\mathcal{Y}, d_{\mathcal{Y}})$ avec un coût $c = d_{\mathcal{X}}^p$ pour $p \geq 1$, la distance de Wasserstein p -Wasserstein est définie par $W_p(\mu, \nu) := (\mathcal{T}_{d^p}(\mu, \nu))^{\frac{1}{p}}$, et le barycentre obtenu est un barycentre de Wasserstein. L’ana-

lyse théorique de ces barycentres a été amorcée par [7], où existence et unicité sont étudiés pour des coûts génériques c . Des études plus spécifiques ont été proposées par la suite pour W_2 [1], W_1 [6], ou W_p pour $p > 1$ [5], pour des mesures absolument continues sur \mathbb{R}^d .

Le calcul numérique de ces barycentres est NP-difficile [2]. Pour les calculer en temps raisonnable, on peut les remplacer par des barycentres pour Sliced-Wasserstein [14], des barycentres entropiques [8], ou utiliser une approche de point fixe [8, 3] basée sur l’itération $\mu_{t+1} = (\sum_k \lambda_k T_k) \# \mu_t$, où les T_k sont les applications de transport optimal entre le barycentre courant μ_t et les mesures ν_k . La convergence de cette approche est démontrée dans [3] pour le coût W_2 et des mesures absolument continues. En pratique, cet algorithme est implémenté sous forme discrète dans les bibliothèques de transport optimal numérique comme POT [9], à nouveau pour W_2 , et cette implémentation repose fortement sur l’existence des T_k .

Dans cet article, nous généralisons cette méthode de point fixe pour calculer des barycentres entre mesures pour des coûts c_k génériques, sans hypothèse sur les mesures ν_k et sans supposer l’existence d’applications optimales T_k . Nous montrons la convergence de cette approche, nous l’illustrons sur divers exemples numériques mettant en évidence l’intérêt d’utiliser des coûts de transport robustes aux outliers plutôt que W_2 . Cet article reprend la théorie présentée dans [16] (qui contient les preuves des résultats). La partie expérimentale est nouvelle.

2 Formulation du Problème

Nous travaillons avec des mesures de probabilité ν_k sur des espaces métriques compacts $(\mathcal{Y}_k, d_{\mathcal{Y}_k})_{k \in \llbracket 1, K \rrbracket}$, dont nous cherchons un "barycentre" μ , dans un espace métrique compact $(\mathcal{X}, d_{\mathcal{X}})$. Pour comparer une mesure $\nu_k \in \mathcal{P}(\mathcal{Y}_k)$ et $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, nous considérons des fonctions de coût continues $c_k : \mathcal{X} \times \mathcal{Y}_k \rightarrow \mathbb{R}_+$. Un barycentre sera un minimiseur de la somme des coûts de transport par rapport à la mesure ν_k , ce qui conduit à l'énergie V définie dans (1). La définition d'un barycentre entre les mesures ν_k peut être vue comme un relèvement d'une notion de barycentre au sein de \mathcal{X} pour des points (y_1, \dots, y_K) de $\mathcal{Y}_1 \times \dots \times \mathcal{Y}_K$. Afin de donner un sens mathématique à cette intuition ainsi qu'à notre méthode, nous adopterons l'hypothèse suivante tout au long de cet article.

Hypothèse 1. *Pour tout $(y_1, \dots, y_K) \in \mathcal{Y}_1 \times \dots \times \mathcal{Y}_K$, l'ensemble $\operatorname{argmin}_{x \in \mathcal{X}} \sum_{k=1}^K c_k(x, y_k)$ est réduit à un singleton.*

Grâce à l'hypothèse 1, nous pouvons définir une notion de barycentre au sol, que l'on voit comme une fonction B :

$$B : \begin{cases} \mathcal{Y}_1 \times \dots \times \mathcal{Y}_K & \rightarrow \mathcal{X} \\ (y_1, \dots, y_K) & \mapsto \operatorname{argmin}_{x \in \mathcal{X}} \sum_k c_k(x, y_k). \end{cases} \quad (2)$$

3 Méthode de Point Fixe

Etant données K mesures de probabilité $\nu_k \in \mathcal{P}(\mathcal{Y}_k)$, nous allons construire une suite $(\mu_t) \in \mathcal{P}(\mathcal{X})^{\mathbb{N}}$ approchant un barycentre des ν_k , c'est-à-dire une solution de (1). Nous proposons pour cela une version modifiée du schéma itératif de [3]. Pour commencer, nous décrivons dans l'algorithme 1 la méthode de point fixe précédente dans le cas de mesures discrètes toutes portées par n points, pour le cas général, voir [16].

Algorithme 1: Algorithme itératif de calcul des barycentres pour l'équation (1)

Données : Pour $k \in \llbracket 1, K \rrbracket$, $Y_k \in \mathbb{R}^{n \times d_k}$ les supports des ν_k et $b_k \in \Delta_n$ les poids des ν_k . Fonction de coût $c_k : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d_k} \rightarrow \mathbb{R}_+$. Nombre d'itérations T , poids du barycentre $a \in \Delta_n$ et critère d'arrêt $\alpha \geq 0$.

Résultat : barycentre $\mu_T = \sum_{i=1}^n a_i \delta_{x_i^{(T)}}$.

Initialisation : $\mu_0 = \sum_{i=1}^n a_i \delta_{x_i^{(0)}}$ avec $X^{(0)} \in \mathbb{R}^{n \times d}$.

Pour : $t \in \llbracket 0, T-1 \rrbracket$:

1. Pour $k \in \llbracket 1, K \rrbracket$, $\sigma_k \in \operatorname{argmin}_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} \sum_{i=1}^n c_k(x_i^{(t)}, y_{k, \sigma(i)})$.
 2. Pour $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$, $x_i^{(t+1)} = B(y_{1, \sigma_1(i)}, \dots, y_{K, \sigma_K(i)})$.
 3. Si $W_2^2(\mu_{t+1}, \mu_t) < \alpha \|X^{(t)}\|_2^2$, terminer.
-

Pour le cas général, étant donné $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, considérons l'ensemble des couplages multi-marginaux

$$\Gamma(\mu) := \left\{ \gamma \in \mathcal{P}(\mathcal{X} \times \mathcal{Y}_1 \times \dots \times \mathcal{Y}_K) : \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket, \gamma_{0,k} \in \Pi_{c_k}^*(\mu, \nu_k) \right\}, \quad (3)$$

où, pour tout k , $\gamma_{0,k}$ désigne la marginale de γ sur $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}_k$, et $\Pi_{c_k}^*(\mu, \nu_k)$ désigne l'ensemble de tous les couplages optimaux pour le problème de transport entre μ et ν_k associé à la fonction de coût c_k . L'existence de tels multi-couplages est une conséquence du "Lemme de recollement" ([15], Lemme 5.5). Le multi-couplage spécifique suivant fournit un élément explicite de $\Gamma(\mu)$ étant donné $\pi_k \in \Pi_{c_k}^*(\mu, \nu_k)$:

$$\gamma(dx, dy_1, \dots, dy_K) := \mu(dx) \pi_1^x(dy_1) \cdots \pi_K^x(dy_K), \quad (4)$$

où nous avons écrit la désintégration de π_k par rapport à sa première marginale μ sous la forme $\pi_k(dx, dy_k) = \mu(dx) \pi_k^x(dy_k)$. Par abus de notation, notons dans la suite $B\#\gamma := B\#\gamma_{1, \dots, K}$, où $\gamma_{1, \dots, K} \in \mathcal{P}(\mathcal{Y}_1 \times \dots \times \mathcal{Y}_K)$ est la marginale de γ par rapport à (y_1, \dots, y_K) . En termes de variables aléatoires, si

$$(X, Y_1, \dots, Y_K) \sim \gamma,$$

alors $B\#\gamma = \operatorname{Loi}[B(Y_1, \dots, Y_K)]$. Nous définissons l'application multivaluée G qui associe à $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ l'ensemble des itérations suivantes possibles $G(\mu) \subset \mathcal{P}(\mathcal{X})$:

$$G := \begin{cases} \mathcal{P}(\mathcal{X}) & \rightrightarrows \mathcal{P}(\mathcal{X}) \\ \mu & \mapsto B\#\Gamma(\mu) \end{cases}, \quad (5)$$

où $B\#\Gamma(\mu) := \{B\#\gamma, \gamma \in \Gamma(\mu)\}$. À partir d'une mesure $\mu_0 \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$, notre algorithme consiste à choisir des itérés à travers la multi-fonction G :

$$\forall t \in \mathbb{N}, \mu_{t+1} \in G(\mu_t).$$

On peut alors montrer la décroissance de l'énergie des itérées.

Proposition 1. *Soit $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ et $\bar{\mu} \in G(\mu)$. Alors $V(\mu) \geq V(\bar{\mu})$ avec égalité si et seulement si $\mu = \bar{\mu}$. Si μ^* est un barycentre, alors $G(\mu^*) = \{\mu^*\}$.*

Avec l'aide de quelques Lemmes techniques, la proposition 1 nous permet de montrer la convergence sous-séquentielle vers un point fixe de G .

Théorème 2. *Soit $\mu_0 \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ et (μ_t) telle que $\mu_{t+1} \in G(\mu_t)$. Alors (μ_t) a des sous-suites convergentes pour la convergence faible des mesures, dont les limites sont nécessairement des $\mu \in \mathcal{P}(\mathcal{X})$ vérifiant $\mu \in G(\mu)$.*

L'étape charnière de la preuve consiste à établir un contrôle quantitatif sur la décroissance de V le long des itérations.

4 Expériences numériques

Nous présentons dans cette section plusieurs expériences numériques de calcul de barycentres, illustrant la polyvalence de la méthode (en terme de coûts utilisés) et son utilité, notamment pour calculer des barycentres robustes aux mesures outliers. En pratique, le calcul de B n'est pas forcément explicite et peut nécessiter une optimisation coûteuse. Le code et les solveurs correspondant à ces expériences sont disponibles dans notre **toolkit Python**.

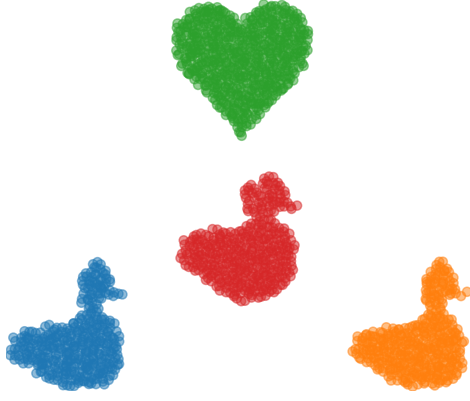


FIGURE 1 – Barycentre de nuages de points pour la norme $\frac{3}{2}$ à la puissance $\frac{3}{2}$.

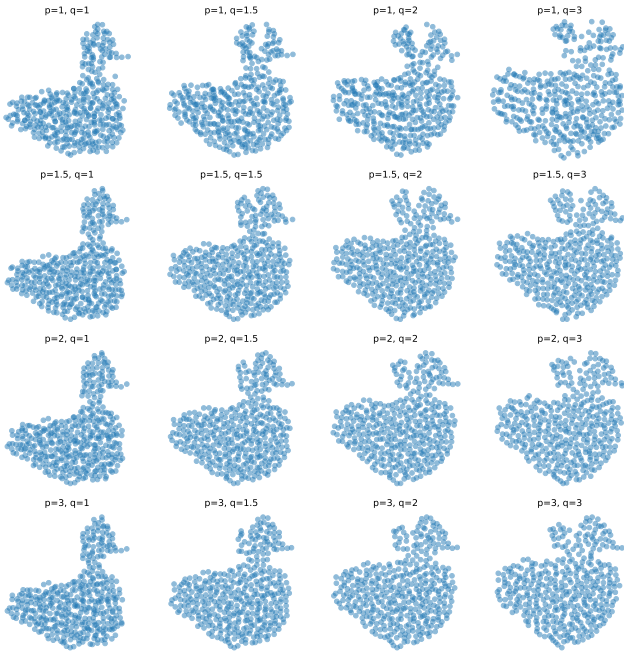


FIGURE 2 – Barycentres pour les mesures de la figure 1, pour des normes p à la puissance q .

Robustesse aux outliers. Coûts $c_k(x, y) = \|x - y\|_p^q$. La figure 1 présente trois mesures discrètes du plan (en bleu, jaune et vert) et leur barycentre (en rouge) pour le coût au sol $\|x - y\|_{3/2}^{3/2}$. Les mesures discrètes sont obtenues en échantillonnant une mesure continue, les deux canards correspondent donc à deux nuages de points différents, échantillons d'une même mesure. La figure 2 présente sous forme de grille les barycentres pour ces 3 nuages de points, pour des coûts au sol $\|x - y\|_p^q$, pour différentes valeurs de p et q . On observe que le barycentre obtenu pour $q = 1$ prend toujours la forme du canard, cette puissance permettant d'être beaucoup plus robuste aux outliers (ici le nuage en forme de coeur), quelle que soit la norme. L'in-

fluence du troisième nuage de points devient de plus en plus évidente lorsque p et q grandissent.

Coûts projetés $c_k(x, y) = \|P_k x - y\|_2$. La figure 3 présente une expérience dans laquelle on cherche une mesure 3D (ici le nuage de points rouges) dont les projections sur des plans sont proches de mesures prédéfinies ν_k (ici un coeur, une croix et un canard). Ce problème peut être vu comme un cas particulier de (1) pour des coûts $c_k(x, y) = \|P_k x - y\|_2$, où P_k est la projection (linéaire) sur le k -ième plan.

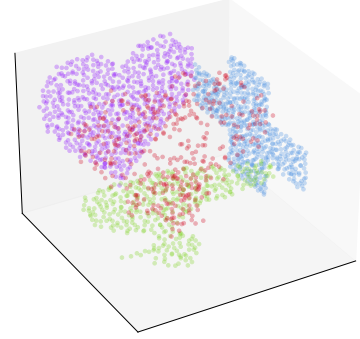


FIGURE 3 – Nuage de points 3D (en rouge) solution du problème de barycentre pour trois mesures 2D portées par des plans différents et pour des coûts $c_k(x, y) = \|P_k x - y\|_2$, où les P_k sont les projections orthogonales sur les plans en question.

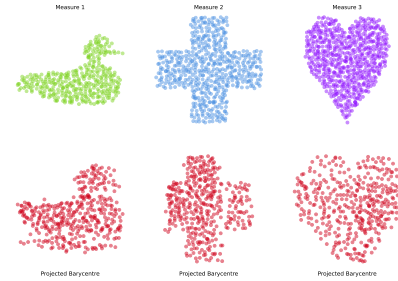


FIGURE 4 – Comparaison entre les mesures cibles (en haut) et les projections du barycentre sur les plans respectifs de ces mesures.

Transfert vers un barycentre de distribution de couleurs. Dans cette dernière expérience, nous considérons un problème de transfert de couleurs. Le but est de calculer le barycentre entre les distributions de couleurs de plusieurs (ici trois) images sources, dont certaines contiennent des couleurs aberrantes, et d'utiliser ensuite ce barycentre comme mesure cible pour modifier les couleurs d'une nouvelle image (appelée *input* ici). La figure 5 montre les images sources, l'image *input*, et la même image *input* après transfert de couleur vers le barycentre de couleur des images sources. Le barycentre est calculé soit pour un coût W_1 , soit pour un coût W_2^2 . Ce transfert est évalué sur des images sous-échantillonnées, l'appariement RGB d'une couleur c de l'image haute résolution étant ensuite choisi

comme $c + \tau$, où τ est la translation de couleur obtenue pour la couleur la plus proche de c dans l'image sous-échantillonnée (cela revient à voir l'appariement comme un champ de translations constant par morceaux). La figure 6, montre les distributions de couleur des différentes images dans l'espace RGB. On observe la robustesse bien supérieure de W_1 aux valeurs de couleur aberrantes.

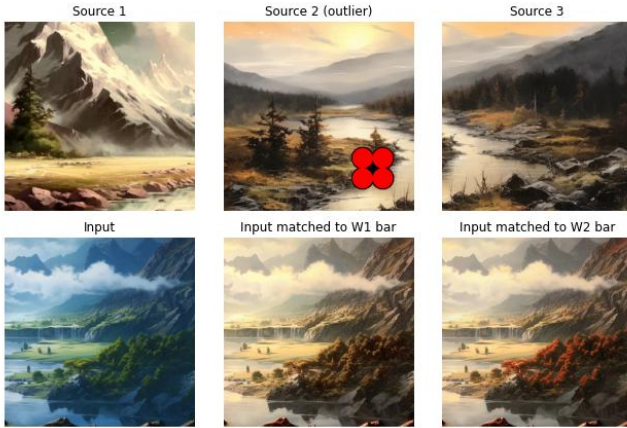


FIGURE 5 – Transfert de couleur appliqué à l'image input vers le barycentre de couleur des images source, pour W_1 et W_2 . Une des images sources contient des couleurs aberrantes.

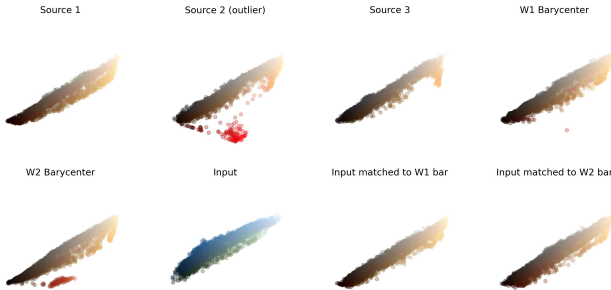


FIGURE 6 – Distributions de couleur des différentes images de la figure 5 ainsi que des barycentres W_2 et W_1 des images sources.

Références

- [1] Martial Agueh and Guillaume Carlier. Barycenters in the Wasserstein space. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 43(2) :904–924, 2011.
- [2] Jason M. Altschuler and Enric Boix-Adsera. Wasserstein barycenters are np-hard to compute, 2021.
- [3] Pedro C Álvarez-Esteban, E Del Barrio, JA Cuesta-Albertos, and C Matrán. A fixed-point approach to barycenters in Wasserstein space. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 441(2) :744–762, 2016.

- [4] Julio Backhoff-Veraguas, Joaquín Fontbona, Gonzalo Rios, and Felipe Tobar. Bayesian learning with wasserstein barycenters. *ESAIM : Probability and Statistics*, 26 :436–472, 2022.
- [5] Camilla Brizzi, Gero Friesecke, and Tobias Ried. p -Wasserstein barycenters. *Nonlinear Anal., Theory Methods Appl., Ser. A, Theory Methods*, 251 :19, 2025. Id/No 113687.
- [6] Guillaume Carlier, Enis Chenchene, and Katharina Eichinger. Wasserstein medians : Robustness, pde characterization, and numerics. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 56(5) :6483–6520, 2024.
- [7] Guillaume Carlier and Ivar Ekeland. Matching for teams. *Economic theory*, 42 :397–418, 2010.
- [8] Marco Cuturi and Arnaud Doucet. Fast computation of Wasserstein barycenters. In Eric P. Xing and Tony Jebara, editors, *Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning*, volume 32 of *Proceedings of Machine Learning Research*, pages 685–693, Beijing, China, 22–24 Jun 2014. PMLR.
- [9] Rémi Flamary, Nicolas Courty, Alexandre Gramfort, Mokhtar Z. Alaya, Aurélie Boisbunon, Stanislas Chambon, Laetitia Chapel, Adrien Corenflos, Kilian Fatras, Nemo Fournier, Léo Gautheron, Nathalie T.H. Gayraud, Hicham Janati, Alain Rakotomamonjy, Ievgen Redko, Antoine Rolet, Antony Schutz, Vivien Seguy, Danica J. Sutherland, Romain Tavenard, Alexander Tong, and Titouan Vayer. POT : Python optimal transport. *Journal of Machine Learning Research*, 22(78) :1–8, 2021.
- [10] Nhat Ho, XuanLong Nguyen, Mikhail Yurochkin, Hung Hai Bui, Viet Huynh, and Dinh Phung. Multilevel clustering via wasserstein means. In *International conference on machine learning*, pages 1501–1509. PMLR, 2017.
- [11] Alexander Korotin, Vage Egiazarian, Lingxiao Li, and Evgeny Burnaev. Wasserstein iterative networks for barycenter estimation. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 35 :15672–15686, 2022.
- [12] Liang Mi, Wen Zhang, Xianfeng Gu, and Yalin Wang. Variational wasserstein clustering. In *Proceedings of the European Conference on Computer Vision (ECCV)*, pages 322–337, 2018.
- [13] Eduardo Fernandes Montesuma and Fred Maurice Ngole Mboula. Wasserstein barycenter for multi-source domain adaptation. In *Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition*, pages 16785–16793, 2021.
- [14] Julien Rabin, Gabriel Peyré, Julie Delon, and Marc Bernot. Wasserstein barycenter and its application to texture mixing. In *Scale Space and Variational Methods in Computer Vision : Third International Conference, SSVM 2011, Ein-Gedi, Israel, May 29–June 2, 2011, Revised Selected Papers 3*, pages 435–446. Springer, 2012.
- [15] Filippo Santambrogio. Optimal transport for applied mathematicians. *Birkhäuser*, NY, 55(58-63) :94, 2015.
- [16] Elói Tanguy, Julie Delon, and Nathaël Gozlan. Computing barycentres of measures for generic transport costs. *arXiv preprint arXiv :2501.04016*, December 2024.